

第17期CJC论坛暨优秀论文作者（2020年）学术报告会

报告时间：2023年3月25日

报告地点：君谋楼报告厅

欢迎听讲！



报告题目：热振动关联函数理论与MOMAP计算软件的开发

报告摘要：理论计算化学的核心是发展计算方法，尽管目前的计算化学软件已经能够基本解决化学中的许多问题，但是某些核心问题尚未可靠而实用的方法，尤其是与激发态相关的性能，是计算化学的挑战之一。以发光过程为例，计算软件可以给出大致可靠的发光波长，但是对于发光模型和发光效率一直没有好的方法。这是因为这与电子激发态的振动耦合与弛豫速率相关，时间尺度从纳秒到毫秒，比微观理论能处理的飞秒-皮秒长得多，典型的电子态演化的步长是阿秒，从而会带来累积误差。我们在微扰论的框架下，提出了TVCF(Thermal Vibration Correlation Function)的理论形式，得到了非常热跃迁速率的含时积分的矩阵表达式，从而高效地应用于计算发光效率、发光光谱、电荷迁移率等性能。我们对该方法编程并计算软件MOMAP (Molecular Materials Property Prediction Package)，先前已经在网上公开发布，很受欢迎，很快被下载了2600多次，包括美国斯坦福大学以及刚成立的中国有机发光材料企业。在此基础上，我们把软件著作权转让给上海鸿之源科技有限公司，作为商业化软件销售，5年来商业用户超过135家，其中包括20家海外用户，也有日本住友寺5家化工企业。本报告将重点介绍我们往澄清国际上对有机/高分子电导机制、载流子迁移率以及发光过程的研究，我们还将介绍国际同行应用MOMAP软件取得的研究成果。

帅志刚 教授

香港中文大学（深圳）/清华大学



报告题目：手性吲哚化学

报告摘要：手性吲哚类化合物在手性药物、手性催化剂、手性功能材料的研发等方面显示出了巨大的潜力。但是，手性吲哚化学的发展却只有十几年的时间，属于一个亟待发展的重要领域。现代合成化学正朝着精准高效和高选择性这一方向发展，所以手性吲哚类化合物的高效、高选择性合成已经成为手性吲哚化学领域的关键科学问题。我们课题组围绕这一关键科学问题开展了系统性研究工作，针对吲哚不对称转化的传统方式中存在的挑战性问题，提出了构建手性吲哚杂环骨架的新策略：设计和开发新型吲哚类平台分子及其参与的催化不对称新反应。在此策略指引之下，实现了新型手性吲哚类化合物的高效、高选择性合成；发现了吲哚类平台分子的独特反应性和选择性，阐明了后机理和通过全钯源的均相催化促进其发展的机理。促进了手性吲哚化学的发展。本报告将简要介绍我们通过

石枫 教授
新加坡南洋理工大学/常州大学



报告题目：NHC Catalysis, Medicines, and Agrochemicals

报告摘要：The CJC forum is committed to the development of research that addresses problems of both academic and practical significance. In this report, we will introduce our research focus on the development of new activation modes and reaction mechanisms of NHC catalysts, and their applications in asymmetric synthesis, pharmaceuticals, and agrochemicals. We have developed a series of novel NHC catalysts with unique properties, such as high efficiency, low cost, and environmental friendliness, which have been successfully applied in various fields. This report will also introduce our research on the development of new activation modes and reaction mechanisms of NHC catalysts, and their applications in asymmetric synthesis, pharmaceuticals, and agrochemicals.

池永贵 教授

Prof. Yonggui Robin Chi
新加坡南洋理工大学/贵州大学



孙道峰 教授
中国石油大学（华东）

报告题目：晶态多孔材料的结构调控及其气体分离性能研究

报告摘要：低密度烃的高效低成本分离对于高纯化工产品的生产具有重大战略价值。晶态多孔材料在低碳烃分离展示出独特优势。报告将围绕晶态多孔材料结构调控、吸附剂和分离器的构建展开：1) 发展了多组分协同调子枢轴铰链、多金属位点孔环境工程调控等策略，实现了晶态多孔材料结构精准调控；2) 明确了框架与气体间的主客体相互作用机制，揭示了框架结构对气体吸附和分离性能的影响机理；3) 将晶态多孔材料作为有序高分子单体通过界面聚合策略构筑柔性、超薄、可扩大化制备的膜材料，借助孔径筛分效应，实现了系列膜能源环境领域的应用。

时间

议程

主持人

9:20-9:30

开幕致辞

游书力

9:30-10:30

帅志刚（香港中文大学（深圳）/清华大学）
热振动关联函数理论与MOMAP计算软件的开发

刘国生

10:30-11:30

石枫（江苏师范大学/常州大学）
手性吲哚化学

14:00-15:00

池永贵（新加坡南洋理工大学/贵州大学）
NHC catalysis, Medicines, and Agrochemicals

王新平

15:00-16:00

孙道峰（中国石油大学（华东））
晶态多孔材料的结构调控及其气体分离性能研究

16:00-16:10

闭幕

麻生明

项域
室、分
子之
固体与
材料在



WILEY-VCH

17 CJC

(2020)

2023 3 25

2023 3 25